

***Международная сетевая гибридная (онлайн и
он-камус) PhD программа
"Теория и Компьютерный Дизайн
Функциональных Материалов"***

Анатолий Коркин

Arizona State University



Anatoli Korkin

June 2019



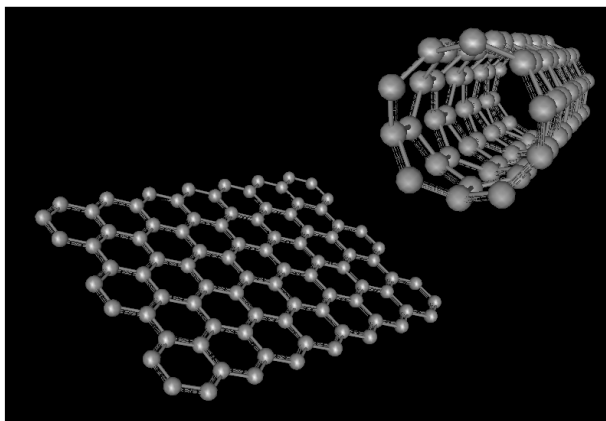
Предпосылки и предистория

- В современном мире ни одна область материаловедения от фармакологии до строительства не обходится без теории и моделирования.
- В СССР были сильные школы по теоретической химии и физике молекул и твердого тела, многие из которых перестали существовать из-за эмиграции и ухода и в мир иной их создателей и ведущих экспертов.
- Возрождение и расширение данного направления науки и образования в России актуально и может быть реализовано в кооперации российских и зарубежных ученых, в том числе представителей научной диаспоры

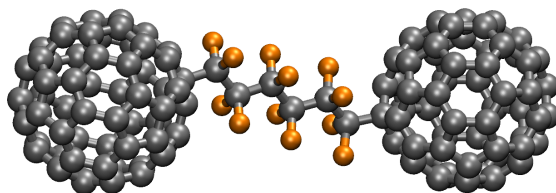
**с использованием методов онлайн образования
и дистанционного управления
проектами и интернет коммуникации**



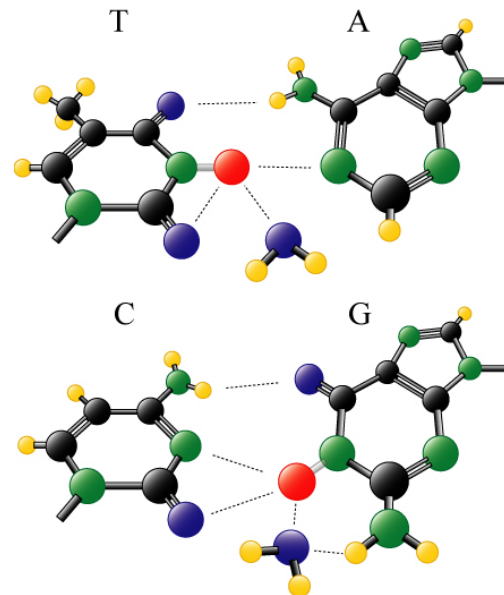
О каких материалах идет речь



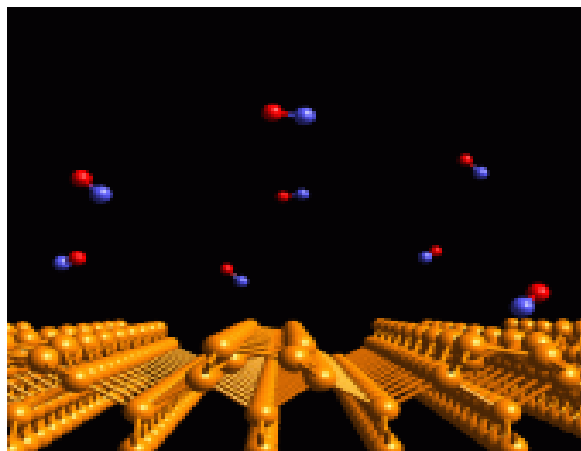
Graphene and carbonanotube



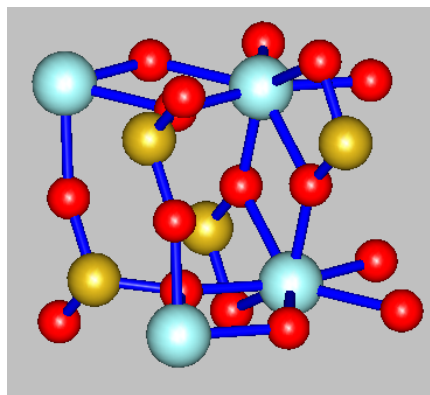
Molecular electronic device



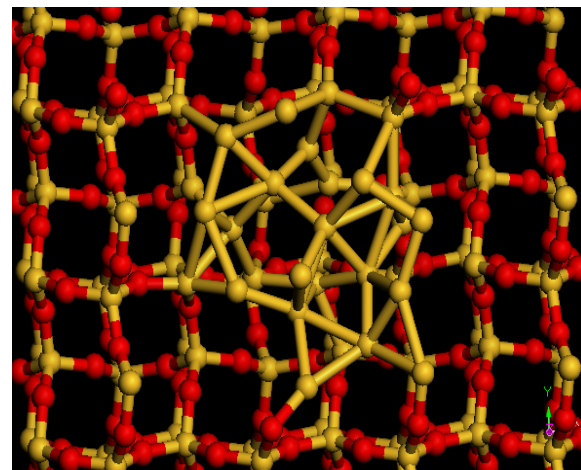
DNA building blocks



Si surface + NO molecules



Zircon, ZrSiO₄



SiO₂ crystal with Si dot inside

Anatoli Korkin

June 2019



Что мы предлагаем

**Разработка международной образовательной PhD программы по теории и компьютерному дизайну функциональных материалов.
(Theoretical and Computational Molecular and Material Science)**

Алгоритм и пошаговая инструкция

- 1. Собрать консорциум заинтересованных экспертов и научно-образовательных организаций (в первую очередь университетов)**
- 2. Разработать прототип курикулума (учебного плана).**
- 3. Разработать логистическую и финансовую модель устойчивого развития и долгосрочного функционирования программы**
- 4. Получение инвестиций от партнеров и фондов на развитие программы (1-й этап)**



Алгоритм и пошаговая инструкция (Продолжение)

- 5. Выбор и внедрение отдельных курсов на кампусах и онлайн программ университетов-партнеров в рамках существующих программ для PhD студентов (курсы по выбору) и дополнительного образования (сертификаты).**
 - 6. Создание массовой маркетинговой поддержки программы на российском и международном рынке образовательных услуг**
 - 7. Получение грантов на развитие программы и оплаты за обучение (2-этап)**
 - 8. Внедрение и открытие полноценных PhD в университетах партнерах (Россия, США, Европа, Китай ...)**
 - 9. Устойчивое развитие и функционирование программы. Источники финансирования: гранты и оплата за обучение, заказные научные исследования, конференции, публикации, коммерциализация софта и консультации.**
 - 10. Создание института (российского, российско-американского, международного, ...) теории и компьютерного дизайна функциональных материалов.**
-



Логистика программы

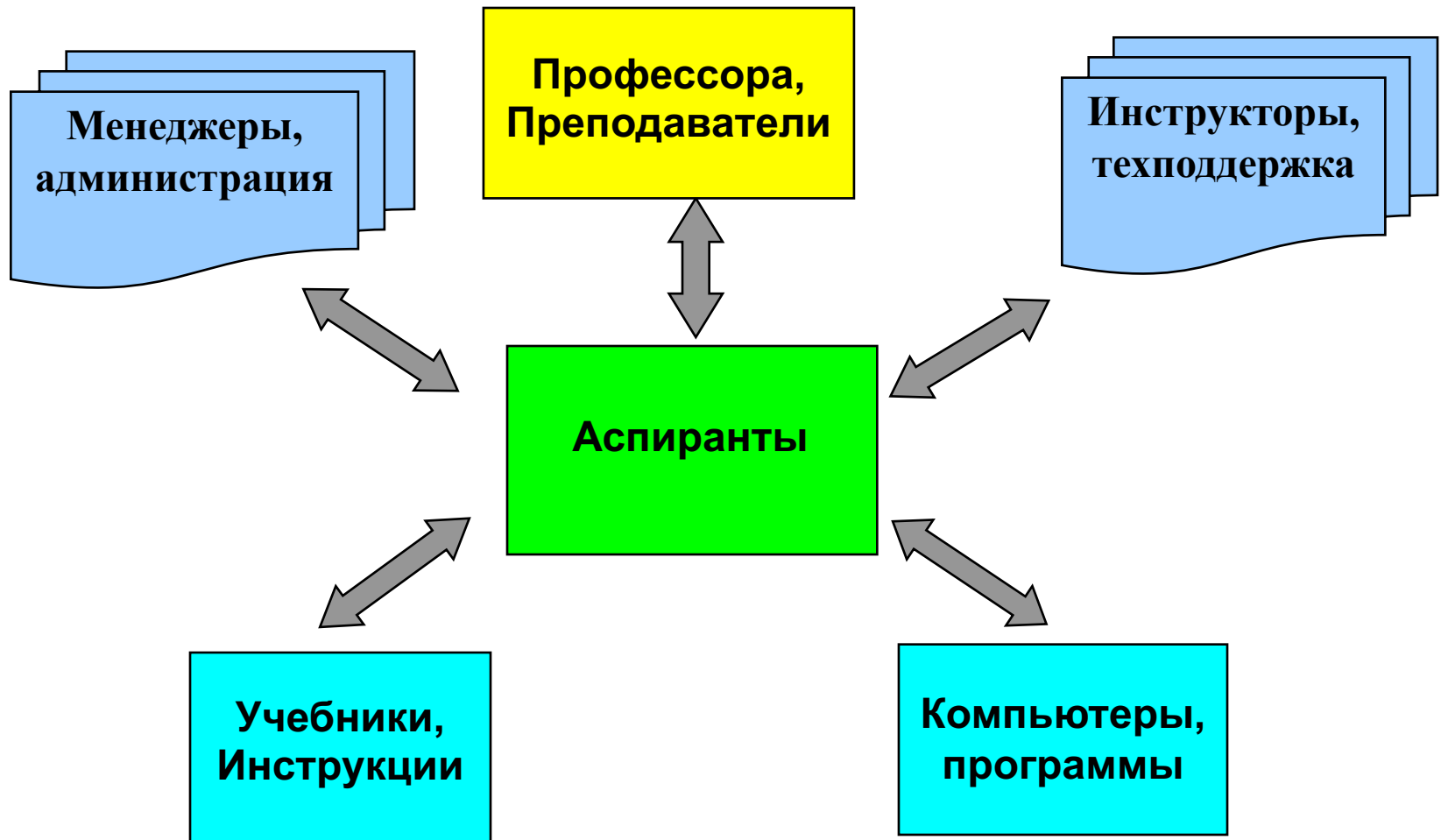
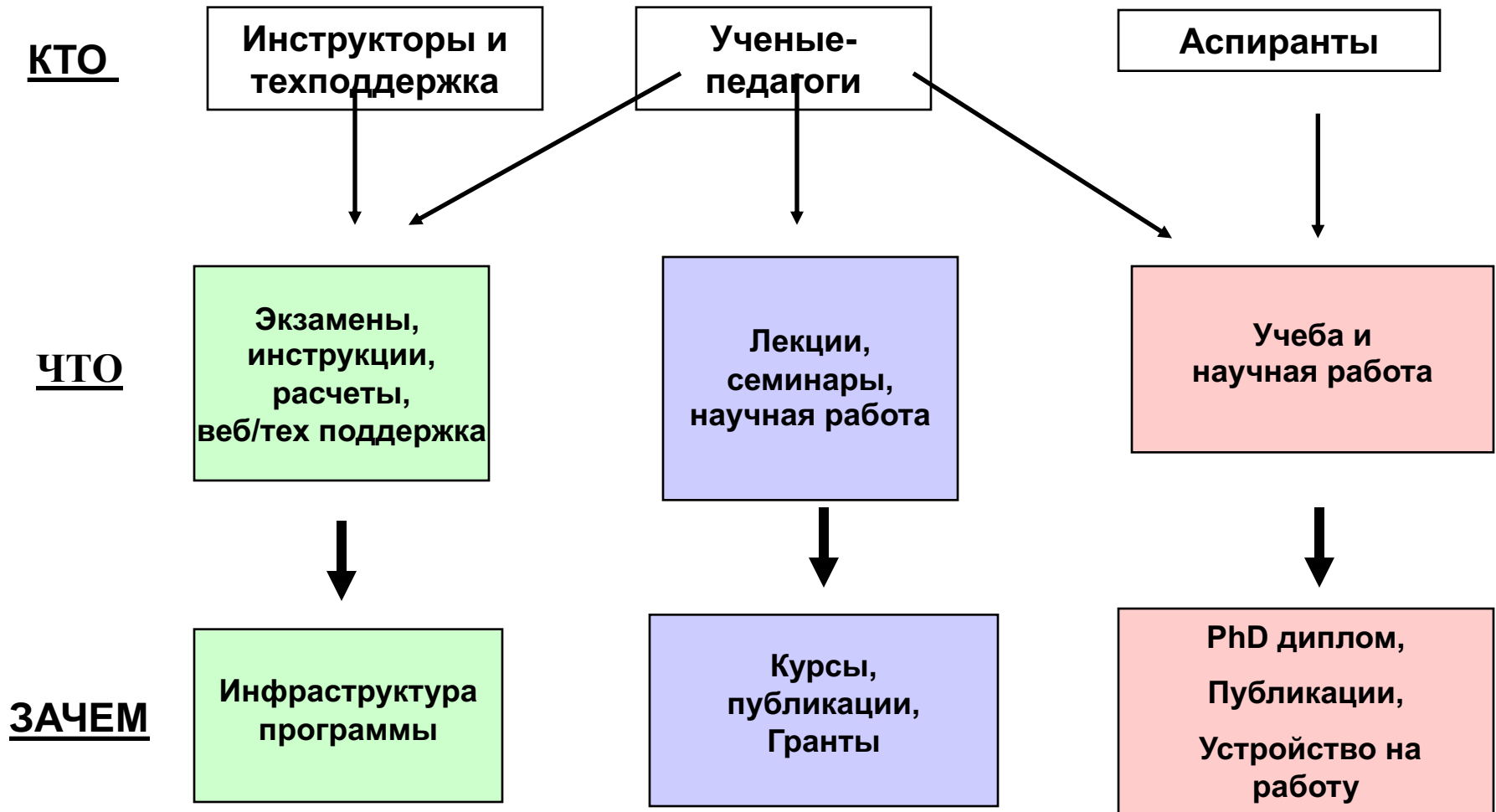


Схема научно-образовательной деятельности



Логистика программы: Что и как делаем

Участники программы

- Профессора: составляют учебные планы курсов, ведут лекции и веб/сем/инары, осуществляют запись лекций на видео, ведут научную работу с аспирантами (PhD students);
- преподаватели: ведут лекции и веб/сем/инары, осуществляют запись лекций на видео, принимают зачеты и экзамены;
- инструкторы - оказывают техническую помощь на лекциях, веб/сем/инарах, экзаменах, и при выполнении расчетных задач;
- технические эксперты (программисты, веб дизайнеры, специалисты по вычислительной технике): развитие и техническая поддержка программы;
- "эффективные менеджеры": развивают и поддерживают логику, финансовую модель и инфраструктуру программы;
- аспиранты: учатся и занимаются научной работой;
- меценаты: содействуют устойчивому развитию программы



Логистика программы: Продолжение

Внешние взаимодействия

- Университеты-партнеры заключают между собой договоры о взаимном признании курсов, совместных инвестициях в развитие программы и совместном использовании вычислительных ресурсов и персонала.
- Профессора осуществляют научное руководство аспирантами совместно с коллегами университетов-партнеров;
- Независимые ученые, преподаватели, инструкторы и технические эксперты заключают договора с университетами на участие в программе;
- Университеты-партнеры заключают договора об использовании принадлежащей им и "совместно нажитой" интеллектуальной собственности, совместных заявках на гранты и научной деятельности на коммерческой основе (работа с компаниями).
- Аспиранты числятся в одном из университетов партнеров и получают в них PhD дипломы. Возможны договоры о выдаче двух или двойных дипломов в зависимости от законодательств в государствах, где университеты партнеры осуществляют свою научно педагогическую деятельность



Аналогичные программы: Примеры I (Chemistry)

University of San Diego: PhD and MS in Theoretical and Computational Chemistry: <https://chemistry.ucsd.edu/graduate-program/program-tracks/theoretical-computational.shtml>

Southern Methodist University at Dallas: PhD in Theoretical and computational chemistry: <https://sites.smu.edu/dedman/catco/graduate-program.html>

Michigan State University: MS in Computational Chemistry: <https://reg.msu.edu/academicprograms/ProgramDetail.aspx?Program=3997&PType=DP>

Illinois Institute of Technology: BS in Computational Chemistry and Biochemistry: <https://science.iit.edu/programs/undergraduate/bachelor-science-computational-chemistry-and-biochemistry>



Аналогичные программы: Примеры II (Materials)

Malmo University: MS in Computational Materials Science:

<https://edu.mau.se/TACMA>

Technical University of Freiburg: MS in Computational Materials Science:

<https://tu-freiberg.de/en/studies/master-computational-materials-science>

University of Erlangen-Nurnberg: MS in Computational Materials Science:

<https://www.ce.studium.fau.eu/prospective-students/technical-application-fields-taf/computational-material-science/>

Boise state University: Certificate program in Computational Materials and Engineering:

<https://www.boisestate.edu/graduatecollege/programs2/computational-materials-science-engineering/>



Эксперты в Университете Штата Аризона

Oliver Beckstein: Simulations of biomolecules

Antia Botana: Electronic structure of materials

Anrew Chizmeshya: Electronic structure of materials

Steve Goodnick: Theory and computations of semiconductors

Matthias Heyden: simulations of biomolecules

Anatoli Korkin: Applied quantum chemistry

Dmitry Matyushov: Simulations of biomolecules/theory

Vladimiro Mujica: Computations of materials and biomolecules/theory

Banu Ozkan: Simulations and theory of biomolecules

Steve Presse: Data analysis/theory

Arunima Singh: Electronic structure of materials

Abhishek Singharoy: Simulations of biomaterials

Petr Sulc: Simulations of biomolecules

